



TITLE:

線形応答とエントロピー変化(生成) : 不可逆性の熱統計力学的解明 (量 子科学における双対性とスケール)

AUTHOR(S):

鈴木, 増雄

CITATION:

鈴木, 増雄. 線形応答とエントロピー変化(生成): 不可逆性の熱統計力学的解明 (量子科学における双対性とスケール). 数理解析研究所講究録 2010, 1705: 13-29

ISSUE DATE:

2010-08

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/170125>

RIGHT:

線形応答とエントロピー変化(生成) — 不可逆性の熱統計力学的解明 —

東京理科大学理学部 鈴木増雄(Masuo Suzuki)
Tokyo University of Science

要約: 線形応答理論の枠組みで不可逆性の本質である エンタルピー生成を明確に説明するという長年懸案であった概念的問題を解決した。すなわち, 線形応答理論の熱力学的基礎づけとその一般化に成功した。まず 節 1 に非平衡エントロピー演算子 \mathcal{S} を体系のハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ を用いて, $\mathcal{S} = (\mathcal{H}(t) - F_0(\beta))/T$ によって定義する。ただし, 体系は温度 T の熱浴によって準定常状態に制御されているものとする。また, $F_0(\beta) = -k_B T \log (\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_0))$ で与えられる, 言わば, 初期状態の自由エネルギーに相当する量である。節 2 に, 求めたい物理量 Q に対応して, その対称性を特徴づける成分を

を取り出す射影演算子 P_Q を導入し, $\langle Q \rangle(t) = \text{Tr} Q P_Q \rho(t)$ により非平衡不可逆系の期待値 $\langle Q \rangle_{irr}(t)$ を求める。ただし, $\rho(t)$ は系の密度行列である。さらに, $\rho(t) = \rho_0 + \rho_1(t)$, $\rho_1(t) = -A \cdot F(t)$ において, ρ_0 と $\rho_1(t)$ (すなわち外力 $F(t)$) とは対称性が異なるので, 流れ $j = A$ を求める場合には射影演算子 P_{odd} を, エントロピー生成 $dS_{irr}(t)/dt$ を求めるときは P_{even} を用いて射影した密度行列 $\rho_{odd}(t) = P_{odd} \rho(t) = \rho_1(t) + \rho_3(t) + \dots$, $\rho_{even}(t) = P_{even} \rho(t) = \rho_0 + \rho_2(t) + \dots$ を用いて, それぞれの期待値を求める。^{*}

特に, 非平衡系としてもっとも典型的な静的電界 E での電気伝導におけるエントロピー生成の最低値は, $dS_{irr}(t)/dt = \frac{1}{T} \text{Tr} \rho_0 \rho_2'(t) = -\frac{1}{T} \langle j_1 \rangle^{(0)} = \frac{1}{T} \frac{E^2}{\tau}$ となり, ジュール熱発生によるエントロピー生成が適確に導かれる。ただし, $\rho_2 = -e \sum_{j=1}^N v_j \cdot E = -A \cdot F$, ρ_1 は電気伝導度である。^{*} (ここで, $\rho_n(t)$ は $\rho(t)$ の外力の n 次項。)

1. はじめに

今から約50年前筆者が久保研の院生になった頃の物理に関する諸題の中心は, 超伝導に関するBCS理論と不可逆過程に関する久保の線形応答の一般論^{1,2)}であった。久保先生の論文¹⁾を初めて読んだ時から筆者の抱き続けていた概念的問題は, 線形応答理論と熱力学との関係であった。特に, 線形応答, エルゴード性および運動の定数に関する相互の関係については, 後にコーネル大学に滞在中に一応自分なりに納得する解答に達した³⁻⁵⁾。最大の概念的難問は, フリゴジンを中心とする非平衡熱力学すなわち不可逆性の本質

である散逸を表す「エントロピー生成の研究」⁶⁾と、日本における久保先生を中心とする「線形応答」の理論的研究の2つが筆者の頭の中では、しっかりと折り合いがつかない。

1978年にプリゴジンが主催した第17回ソルベイ会議に招待講演を依頼されて以来⁷⁾、筆者はブラッセルのプリゴジンをしばしば訪問し、彼から非平衡熱力学の重要性をくり返し聞かされた。エントロピー生成に関する法則が物理の中でもっとも基本的な法則であると彼は主張していたように思われた。⁶⁾

「2008年日本物理学誌の線形応答理論50周年の特集」でも、エントロピーは不問になっていると斎藤は指摘している。⁸⁾ 歴史的には、線形応答理論成立の前後に多くの人がこの問題に挑んでいたようであるが、^{9,10)} 教科書で簡潔に説明したくなるような理論が見つからなかったようである。筆者の当報告がこの要望に答えるものであることを願っている。

2. 平衡系における線形応答とエントロピー変化

この問題は平衡統計力学の演習問題臭に過ぎないが、本題に入る準備として簡単に要約しておきたい。ハミルトニアン \mathcal{H}_0 が外場 F (それに共役な物理量を A) によって $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - AF$ に変化し平衡に達した場合における

エントロピーの変化 $\Delta S \equiv -k_B \text{Tr} \{ \rho \log \rho - \rho_0 \log \rho_0 \}$ は、 ρ_0 の対称性によって、外場の1次から現れる場合と2次から現れる場合があることを強調しておきたい。すなわち、物理量 A の反転操作 ($A \rightarrow -A$) に対して、 ρ_0 が不変であれば、 ΔS は F の2次から始まる。そうでなければ、1次の寄与が現れる。例えば、磁場のある系にさらに磁場を強くすると、常磁性体では、 ΔS は追加した磁場 ΔH に比例して減少する。これは、断熱消磁法の説明に使われる特徴の一つである。温度 T を変化させた場合 ($T \rightarrow T = T + \Delta T$) は、 $A = \rho_0$, $F = \Delta T/T$ より、

$$\Delta S = \left(\frac{\Delta T}{T} \right) \cdot \left(\frac{1}{k_B T^2} \right) \langle (\rho_0 - \langle \rho_0 \rangle)^2 \rangle_0 = \frac{\Delta T}{T} \cdot C = \frac{\Delta Q}{T} \quad (2.1)$$

のように ΔT の1次の効果が現れる。これは当然のことであるが、 ΔS が“外場” F の1次の例としては、非常にユニークな例であり、非平衡系の問題で局所平衡分布の物理的役割を議論する際に参考になるであろう。その他、いろいろと議論できる問題も多々あるが、急いで本題に入ることしよう。

3. 線形応答スキームにおける不可逆性: エネルギー生成
 物理学において, 「近似」は近似以上の本質的な物理的意味を持つことがある。例えば, 自然現象を記述するモデルは近似であるが, 却ってその現象の本質的部分を浮きぼりにすることもある。ニュートン力学は量子力学の近似理論であるが, 決定論的世界観を与えた点で, 概念的にも大きな意味を持っている。また, 近藤効果の問題では, 磁気的不純物を含む金属の電気抵抗が温度に関して極小を示すのは何故かという長年の疑問が, ボルン近似による $\log T$ の発見により解き明かされた。そのフェルミ面効果としての量子的本質が, 2次のボルン近似で浮きぼりにされたことは大変教訓的である。

さて, 本題の線形応答理論では, 密度行列 $\rho(t)$ に対する次のフォク・プランク方程式から出発する:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [\mathcal{H}(t), \rho(t)]. \quad (3.1)$$

ここで, ハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ を $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t)$ と分けて, 外力の項 $\mathcal{H}_1(t) = -A F(t)$ に関して 1次まで摂動展開する。^{1, 9-13)}

すなわち, $\rho(t) = \rho_0 + \rho_1(t)$; $\rho_0 = \exp(-\beta \mathcal{H}_0) / \mathcal{Z}_0(\beta)$; $\mathcal{Z}_0(\beta) = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_0)$ において, $\rho_1(t)$ の方程式を

求めると^{1, 9-13)}

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_1(t)] + [\mathcal{H}_1(t), \rho_0] \quad (3.2)$$

となり, この解は, $U_0(t-s) = \exp\left(\frac{t-s}{i\hbar} \mathcal{H}_0\right)$ を用いて

$$\rho_1(t) = \int_{t_0}^t U_0(t-s) \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}_1(s), \rho_0] U_0^\dagger(t-s) ds \quad (3.3)$$

と与えられる。久保の恒等式¹⁾または量子微分¹²⁾

$$\begin{aligned} [A, e^{-\beta \mathcal{H}_0}] &= e^{-\beta \mathcal{H}_0} \int_0^\beta e^{\lambda \mathcal{H}_0} [\mathcal{H}_0, A] e^{-\lambda \mathcal{H}_0} d\lambda \\ &= -i\hbar e^{-\beta \mathcal{H}_0} \int_0^\beta e^{\lambda \mathcal{H}_0} \dot{A} e^{-\lambda \mathcal{H}_0} d\lambda = -i\hbar e^{-\beta \mathcal{H}_0} \int_0^\beta \dot{A}(-i\hbar \lambda) d\lambda \end{aligned} \quad (3.4)$$

を用いると

$$\rho_1(t) = \rho_0 \int_{t_0}^t ds \int_0^\beta d\lambda F(s) \dot{A}(s-t-i\hbar\lambda) \quad (3.5)$$

となる。 \dot{A} はAの流れ j を表す($j = \dot{A} = \frac{1}{i\hbar} [A, \mathcal{H}_0]$)
したがって, 流れの期待値 $\langle j \rangle_t$ は線形近似では

$$\langle j \rangle_t = \text{Tr} \{ (\rho_0 + \rho_1(t)) j \} = \int_{t_0}^t ds \int_0^\beta d\lambda \langle j j(t-s+i\hbar\lambda) \rangle_0 F(s) \quad (3.6)$$

となる。^{1, 9-13)}

特に、静的電界 E での電気伝導に対しては
 $t_0 = -\infty$ とし、
 $\langle j \rangle = 0$ の E ; $\sigma = \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \langle j j(t+i\hbar\lambda) \rangle_0 dt$ (3.7)
 となる。^{1,9)} (必要に応じて断熱因子 $e^{-\epsilon t}$ を積分の中に入れて)

ここまではよく知られた結果であるが、これから
 の議論に必要なので復習した。

さて、任意の物理演算子 Q の線形応答理論で
 の期待値 $\langle Q \rangle^{(L)}(t)$ は

$$\langle Q \rangle^{(L)}(t) \equiv \text{Tr} \rho^{(L)}(t) Q \quad (3.8)$$

で与えられると長い間信じられてきた。たゞし、 $\rho^{(L)}(t) = \rho_0 + \rho_1(t)$
 式 (3.6) はその良い例である。不可逆性を特徴
 づけるエントロピーを線形応答理論の枠組みで
 求めるには、エントロピー演算子 Q を正確に
 与えなければならぬ。よく知られているように、
 近似的なしの元のダイナミカルな密度行列 $\rho(t)$
 に対して $\text{Tr} \rho(t) \log \rho(t)$ を考えると、これ
 は時間に依らず、エントロピー生成は零になってしまう。
 また、線形近似 $\rho^{(L)}(t)$ に対しても、(3.5) 式で先に
 $t_0 \rightarrow -\infty$ の極限をとると、 $F(t) = E$ (時間に依ら
ない場合) では、

$$\left[\rho_{lr}(t) \right]_{t_0 \rightarrow -\infty} = \rho_0 \left(1 + \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \, j(-t - i\hbar\lambda) E \right) \quad (3.9)$$

となり, $\text{Tr} \left[\rho_{lr}(t) \right]_{t_0 \rightarrow -\infty} \log \left[\rho_{lr}(t) \right]_{t_0 \rightarrow -\infty}$ は

やはり, 時間に依らなくなり, エントロピー生成は説明できます, 多くの人が困っていたようである。

ここでは, エントロピー演算子としては, 正確な元の密度行列 $\rho(t)$ の定常平衡形 ($t_0 \rightarrow -\infty$ に対応する) の対数 $\log[\rho(t)]_{t_0 \rightarrow -\infty}$ を用いる:

$$\begin{aligned} S &= -k_B [\log \rho(t)]_{t_0 \rightarrow -\infty} \\ &= -k_B \log (e^{-\beta \mathcal{H}} / Z_0(\beta)) \\ &= \frac{\mathcal{H} - F_0(\beta)}{T} \quad (3.10) \end{aligned}$$

ただし, $F_0(\beta) = -k_B T \log Z_0(\beta)$; $Z_0(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$ である
すなわち, 通常の平衡熱力学におけるエントロピー S
エネルギー \mathcal{E} および自由エネルギー F との関係 $F = \mathcal{E} - TS$ の拡張になっている。

一般に、ハミルトニアンが時間による場合でも、その時間変化 $\phi(t)$ が充分ゆるやかで、温度 T の熱浴で制御することが物理的に意味を持つ範囲で、エントロピー演算子 $S(t)$ を

$$S(t) = \frac{\phi(t) - F_0(\beta)}{T} \quad (3.11)$$

によって定義する。ただし、 $F_0(\beta)$ は

$$F_0(\beta) = -k_B T \log \text{Tr} \exp(-\beta \phi_0) \quad (3.12)$$

で定義される、 $t=t_0$ での系の自由エネルギーである。

そこで、このエントロピー生成を求める公式を導くことにしよう。物理的には、よく知られているように、エントロピー $S_{\text{irr}}(t)$ およびエントロピー生成 $dS_{\text{irr}}(t)/dt$ は外力 $F(t)$ の偶関数である。ところで (3.11) で定義したエントロピー演算子 $S(t)$ は対称性の

の異なる2つの演算子 \mathcal{H}_0 と $\mathcal{H}_1(t) = -A \cdot F(t)$ も含んでいる。したがって、これを元のダイナミカルな密度行列 $\rho(t)$ で期待値をとると、 $\text{Tr} \rho(t) \log \rho(t)$ の場合と同様に、エントロピーは時間によらなくなり、エントロピー生成は導けないことになる。前述したように、エントロピーは、外力の符号によらない対称的なゆらぎで記述されるはずである。したがって、密度行列 $\rho(t) \equiv \rho(t; F(t))$ を、対称的な成分だけ取り出す演算子 $P_S = P_{\text{even}}$ により射影した偶成分 $\rho_{\text{even}}(t) = P_{\text{even}} \rho(t) = \frac{1}{2} (\rho(t; F(t)) + \rho(t; -F(t)))$

$$= \rho_0 + \rho_2(t) + \rho_4(t) + \dots \quad (3.13)$$

を用いて、エントロピー生成 $dS(t)/dt$ は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S(t) &= \frac{d}{dt} (\text{Tr} S(t) P_{\text{even}} \rho(t)) = \frac{d}{dt} (\text{Tr} S(t) \rho_{\text{even}}(t)) \\ &= \frac{1}{T} \text{Tr} H(t) \frac{d}{dt} \rho_{\text{even}}(t) = \frac{1}{T} \text{Tr} \mathcal{H}_0 \rho'_{\text{even}}(t) \end{aligned} \quad (3.14)$$

と表される。ここで、 $\text{Tr} S'(t) \rho_{\text{even}}(t) = 0$ であることを使った。

特に、静的電界 E の中での電気伝導⁹⁾の問題に上の定式化を適用すると次のようになる。ハミルト=アンは

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1; \mathcal{H}_1 = -A \cdot E, A = e \sum_j \mathbb{I}_j$$

のように時間にあらわには依存しない。(3.15)
 (3.10)式のエントロピー S の表式を用いると、
 この系のエントロピー生成 $dS_{\text{irr}}(t)/dt$ は、
 (3.13)式と (3.14)式より、

$$\frac{dS_{\text{irr}}(t)}{dt} = \frac{1}{T} \text{Tr} \mathcal{H}_0 \rho'_{\text{even}}(t)$$

$$= \frac{1}{T} (\text{Tr} \mathcal{H}_0 \rho'_2(t) + \text{Tr} \mathcal{H}_0 \rho'_4(t) + \dots) \quad (3.14')$$

と書ける。そこで、対称成分の最低次の
 項の寄与を $dS_{\text{irr}}^{(\text{lr})}(t)/dt$ と表すと、これは、

$$\frac{dS_{\text{irr}}^{(\text{lr})}(t)}{dt} = \frac{1}{T} \text{Tr} \mathcal{H}_0 \rho'_2(t) \quad (3.16)$$

となる。ここで、密度行列 $\rho(t)$ の流す
 von Neumann 方程式 (3.1) より、
 $\rho_1(t)$ と $\rho_2(t)$ は次の方程式を満たす:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_1(t)] + [\mathcal{H}_1, \rho_0] \quad (3.17)$$

$$\text{および} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_2(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_2(t)] + [\mathcal{H}_1, \rho_1(t)] \quad (3.18)$$

これを用いると、最低次でのエントロピー生成は

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} S_{\text{irr}}^{(lr)}(t) &= -\frac{1}{i\hbar T} \left(\text{Tr} \mathcal{H}_0 [\mathcal{H}_0, \rho_2(t)] + \text{Tr} \mathcal{H}_0 [\mathcal{H}_1, \rho_1(t)] \right) \\
 &= -\frac{1}{i\hbar T} \text{Tr} [\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1] \rho_1(t) \\
 &= -\frac{1}{T} \text{Tr} \dot{\mathcal{H}}_1 \rho_1(t) \\
 &= -\frac{1}{T} \text{Tr} \dot{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{E} \rho_1(t) \\
 &= -\frac{1}{T} \text{Tr} \dot{\mathbf{j}} \cdot \mathbf{E} \rho_1(t) \\
 &= -\frac{1}{T} \langle \dot{\mathbf{j}} \rangle^{(lr)} \cdot \mathbf{E} = \frac{\sigma \mathbf{E}^2}{T} \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

のように、ジュール熱の \mathbf{E}^2 を用いて表され、よく知られた表式が、von Neumann 方程式から、対称的な状態に射影した密度行列 $\rho_{\text{even}}(t) \equiv \rho_0 + \rho_2(t)$ を用いて直接的に導出される。このように、 $\rho_2(t)$ が振張した空間で考えることにより、不可逆性の本質であるエントロピー生成が導かれた。ここで、注意すべきことは、 $\rho_2(t)$ の時間変化、特に、

エネルギー生成に寄与する (3.18) 式の右辺の
 2項は, $[P_1, \rho_1(t)]$ のように, 線形
 応答の密度行列 $\rho_1(t)$ で表されている
 ことである。これは, 言わば, エネルギー生成
 に関しては, 双線形 (bilinear) 応答
スキーム になっていると言ってもよい。

4. 高次一般展開と不可逆性

前節までの議論は容易に高次へ
 一般化できる。まず, 任意の外場に
 対する“奇 (odd) の対称性”を持つ
 流れ j の期待値 $\langle j \rangle(t)$ は

$$\langle j \rangle(t) = \text{Tr } j(P_{\text{odd}} \rho(t))$$

$$= \text{Tr } j \rho_{\text{odd}}(t)$$

$$= \frac{1}{2} \text{Tr } j \{ \rho(t; F(t)) - \rho(t; -F(t)) \} \quad (4.1)$$

と表される。 $\rho(t)$ を $F(t)$ の中で展開し,

$F(t)$ の n 次の項を $\rho_n(t)$ と書くと, $\rho(t)$ の時間微分は

$$\frac{d\rho(t)}{dt} \equiv \rho'(t) = \rho_1'(t) + \rho_2'(t) + \dots + \rho_n'(t) + \dots \quad (4.2)$$

となり, $\rho_n'(t)$ は次の式を満たすことがフォン・ノイマン方程式 (3.1) からわかる:

$$i\hbar \rho_n'(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_n(t)] + [\mathcal{H}_1, \rho_{n-1}(t)] \quad (4.3)$$

したがって, $\rho_{\text{odd}}(t)$ と $\rho_{\text{even}}(t)$ も, それぞれ次の方程式を満たす:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\text{odd}}(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_{\text{odd}}(t)] + [\mathcal{H}_1(t), \rho_{\text{even}}(t)]$$

(4.4)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\text{even}}(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_{\text{even}}(t)] + [\mathcal{H}_1(t), \rho_{\text{odd}}(t)]$$

(4.5)

これらの方程式を用いると容易に,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_{\text{irr}}(t) &= \text{Tr} S(t) \frac{d}{dt} \rho_{\text{even}}(t) \\ &= \frac{1}{T} \text{Tr} \mathcal{H}_0 \frac{d}{dt} \rho_{\text{even}}(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar T} \text{Tr} \mathcal{H}_0 [\mathcal{H}_1(t), \rho_{\text{odd}}(t)] \end{aligned} \quad (4.6)$$

となり, (3.19)式と同様に変形すると

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} S_{\text{irr}}(t) &= \frac{1}{i\hbar T} \text{Tr} [\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1(t)] \rho_{\text{odd}}(t) \\
 &= -\frac{1}{T} \text{Tr} \dot{\mathcal{H}}_1(t) \rho_{\text{odd}}(t) \\
 &= \frac{1}{T} \text{Tr} \dot{\mathbf{j}} \cdot \mathbf{E} \rho_{\text{odd}}(t) \\
 &= \frac{1}{T} \langle \dot{\mathbf{j}} \rangle_{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{E} \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

のように, 流れの非線形応答 $\langle \dot{\mathbf{j}} \rangle_{\mathbf{E}}$ を用いて,¹⁴⁾ エントロピー生成が表される。 $\langle \dot{\mathbf{j}} \rangle_{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{E}$ は非線形の流れに対するジュール熱を表すので, 上式はよく知られた熱力学の式と一致する。

次に, 流れ $\langle \mathbf{j} \rangle_{\mathbf{E}}$ を電界 \mathbf{E} で展開すると, $\rho_{\text{odd}}(t) = \rho_1(t) + \rho_3(t) + \dots$

とあって, n 次伝導度を σ_n と定義することにより, $\sigma = \sigma_1$ と書くと, $E = |E|$ とは

$$\langle \mathbf{j} \rangle_{\mathbf{E}} = \sigma_1 E + \sigma_3 E^3 + \dots + \sigma_{2n-1} E^{2n-1} + \dots \quad (4.8)$$

となる。よって, エントロピー生成は高次電気伝導度 $\{\sigma_{2n-1}\}$ を用いて

次のように展開できる：

$$\frac{d}{dt} S_{\text{irr}}(t) = \frac{1}{T} \left(0 E^2 + 0_3 E^4 + \dots + 0_{2n-1} E^{2n} + \dots \right) \quad (4.9)$$

また、 $\text{Tr} \rho_1(t) \rho_{2n-1}'(t) = -\text{Tr} \rho_0 \rho_{2n} = \text{Tr} \rho_1(t) \rho_{2n-1}(t)$ の関係式がすべての n について成り立つことは大変興味深い注目すべきことである。ゆえに、 $\text{Tr} \rho_1(t) \rho_{\text{odd}}'(t) = -\text{Tr} \rho_0 \rho_{\text{even}}' = \text{Tr} \rho_1(t) \rho_{\text{odd}}(t) = \langle \rho_1(t) \rangle_t = -\text{Tr} \rho_0 \rho_{\text{odd}}'(t) = \text{Tr} \rho_1(t) \rho_{\text{odd}}(t)$ も成り立つ。

5. まとめ

不可逆性の本質であるエントロピー生成を von Neumann 方程式の解としての密度行列 $\rho(t)$ を対称成分に射影し、それを用いて、適確に定義されたエントロピー演算子の平均をとり、エントロピー生成を表す公式を求めた。それは、電気伝導の場合には、ジュール熱を温度で割った熱力学的表式になることを示した。輸送係数が物理的に意味のある有限の値を持ったためには、体積 $V \rightarrow \infty$ にしてから、 $t_0 \rightarrow -\infty$ にして、相関関数の時間積分をする必要がある。さらに断熱因子が必要になることもある。不可逆性は、情報の縮約をする射影を行う他に上のようないくつかの手段との統合された効果として出現することがわかる。詳しい内容は近く発表の予定である。

謝辞

本研究においては、科学研究費特定領域研究 8079005K “不規則系の統計力学と古典および量子情報統計力学の境界領域の開拓”の支援を受けたことを感謝します。また、この原稿の準備中に、妻謙子が他界しました。長年私を

支えてくれた妻に心から感謝し、結婚前4年間久保先生の秘書をしていた謙子と恩師久保亮五先生への論文を捧げたい。

参考文献

- 1) R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. 12 (1957) 570.
- 2) 日本物理学会誌特集: 総形応答から50年, 63 (2008) No.10.
- 3) M. Suzuki, Physica 51 (1971) 277.
- 4) 鈴木増雄, フジックス, Vol. 3, No. 1 (1982) 26.
- 5) R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, Statistical Physics II - Nonequilibrium Statistical Mechanics, Springer-Verlag (1991), 頁156-157参照.
- 6) I. Prigogine, From Being to Becoming (Freeman, 1980)
- 7) M. Suzuki, Adv. Chem. Phys. 46 (1981) 195.
- 8) 青藤信彦, 日本物理学会誌 64 (2009) 649.
- 9) F. Nakano, Int. J. Mod. Phys. B 7 (1993) 2397.
Prog. Theor. Phys. 15 (1955) 77. および, H. Nakano,
Proc. Phys. Soc. London 82 (1963) 757; M. Ichiyamagi,
Prog. Theor. Phys. 76 (1986) 37.
- 10) 橋爪真樹, 『統計力学の進歩』(編集代表鈴木増雄, 裳華房, 1981)
- 11) G. V. Chester, Rep. Prog. Phys. 26 (1963) 411.
- 12) 鈴木増雄, 『統計力学』(岩波書店, 2000).
- 13) D. N. スバーレフ著: 久保亮五監訳, 鈴木増雄,
山崎義武訳: 『非平衡統計力学』上・下(丸善, 1976, 1977)
- 14) 非総形応答については, S. J. Miyake and R. Kubo,
Phys. Rev. Lett. 9 (1962) 62; K. Tani, Prog. Theor. Phys.
32 (1964) 167; M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 53 (1975) 1657,
ibid Prog. Theor. Phys. Suppl. 69 (1980) 160; M. Suzuki,
Prog. Theor. Phys. 100 (1998) 475; J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) Suppl. A
- 15) M. Suzuki, to be submitted to Physica A. 156.